

Атомистическое моделирование получения композита никель-графен разными методами обработки

Сафина Лилия Ришатовна

Бакирский государственный университет

Баимова Юлия Айдаровна

safliia@mail.ru

В последнее время металлические наноструктуры рассматриваются как перспективные материалы для различных применений. Было показано, что некоторые металлы, такие как Ni, Pt, Pd и Ti, легко присоединяются к полиморфам углерода [1, 2]. Таким образом, металлы могут быть покрыты чешуйками графена или нанотрубками и объединены в трехмерную композитную структуру, где после специальной обработки некоторые графеновые чешуйки будут соединены ковалентными связями и трансформированы из углеродной матрицы sp^2 в sp^3 . В данной работе было проведено моделирование методом молекулярной динамики для исследования способов формирования композита Ni-графен. Обнаружены две возможности получения композита: 1) отжиг после гидростатического сжатия при нулевой или комнатной температуре; 2) гидростатическое сжатие при высоких температурах.

На рис. 1 представлена начальная структура в трехмерном виде. Единичный элемент - чешуйка графена была получена из короткой углеродной нанотрубки удалением ряда атомов вдоль ее оси и заполнена наночастицами Ni. Наночастицы Ni состоят из 21 атома. Ранее было показано, что такой размер наночастицы наиболее благоприятный для лучшего формирования композита [2, 3, 4]. Одна чешуйка графена состоит из 252 атомов углерода, а общее количество атомов в системе составляет $N = 17462$. Трехмерная структура создавалась повторением $4 \times 4 \times 4$ структурных единиц вдоль направлений x , y и z соответственно. Чешуйки, заполненные наночастицами Ni₂₁, были ориентированы в пространстве случайным образом. Во всех случаях использовались периодические граничные условия вдоль направлений x , y и z .

Для получения композита никель-графен, прикладывается к начальной структуре сжатие с последующим отжигом при температурах 1000; 1500; 2000 и гидростатическое сжатие при разных температурах $T = 0$; 300; 1000; 1500; 2000 К до максимально возможных плотностей. Для описания межатомных взаимодействий используются два потенциала – потенциал AIREBO для взаимодействия углерод-углерод и потенциал Морзе для описания взаимодействия никель-никель и никель-углерод. Для описания взаимодействия атомов были выбраны параметры, предложенные в работах [5, 6, 7].

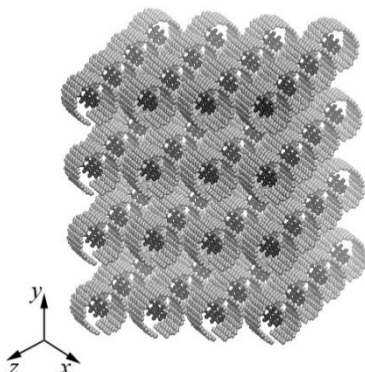


рис.1. Исходная структура графен-никель. Светлым показаны атомы углерода, темным – атомы частиц.

Для оценки прочности полученного композита структуру подвергают гидростатическому растяжению. На рис.2б представлены кривые давление-деформация при растяжении для структуры гидростатически сжатой при 0 и 2000 К. Нужно отметить, что температура положительно влияет на процесс формирования композита. Для структуры, сжатой при температуре 0 К, заметное увеличение p наблюдается до $\varepsilon = 0.2$, после чего дальнейшее растяжение фактически не приводит к увеличению напряжений. В этом случае структурные элементы остались раздельными углеродными частицами, заполненными частицей металла, образования новых ковалентных связей не обнаружено. Такая кривая напряжение-деформация соответствует случаю растяжения материала, состоящего из отдельных элементов, а не цельного композитного материала.

Методом молекулярной динамики изучено влияние гидростатического сжатия в интервале температур от 0 до 2000 К на образование композита графен-никель. Было выявлено, что только нагрев до температур, близких к 2000 К, может привести к ковалентному связыванию графеновых хлопьев и образованию связей между отдельными структурными элементами. Специальная высокотемпературная обработка является эффективным способом изготовления метал-углеродных нанокомпозитов.

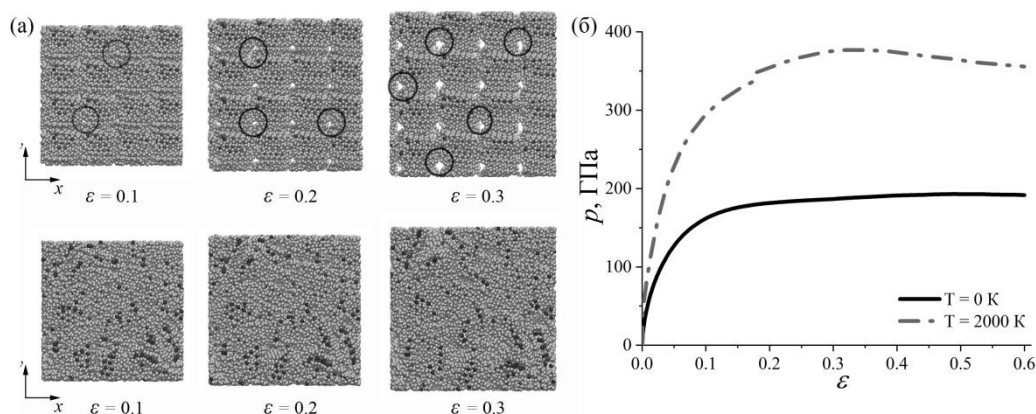


рис.2. (а) Структуры при растяжении для разной степени деформации после гидростатического сжатия при 0 К и после гидростатического сжатия при 2000 К. (б) Кривые давление-деформация при растяжении после гидростатического сжатия при 0 и 2000 К.

Список публикаций:

- [1] Park N., Sung D., Lim S. et al. // *Appl. Phys. Lett.* 2009. V. 94. P. 073105.
- [2] Safina L.R., Baimova J.A., Mulyukov R.R. // *Mech. Adv. Mater. Mod. Process.* 2019. V. 5. P. 1–11.
- [3] Safina L. R., Krylova K. A. // *J. Phys. Conf. Ser.* 2020. V. 1435. P. 012067.
- [4] Сафина Л.Р., Баимова Ю.А. // *ФПСМ. Т.* 16. № 1. 2019. С. 30-36.
- [5] K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, M. M. Maslov. // *IET.* 2018. V. 13. P. 160-164.
- [6] A. Y Galashev, K. P. Katin, M. M. Maslov. // *Physics Letters A, Elsevier BV.* 2019. V. 383., P. 252-258
- [7] L. A. Girifalco, V. G. Weizer. // *Physical Review.* 1959. V. 114. P. 687-690.

Механизмы роста графенового слоя при термическом газофазном осаждении на меди

Смоуж Дмитрий Владимирович

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет

smovzh@itp.nsc.ru

Графен один из самых перспективных материалов современного мира. В настоящий момент сфера его применения в реальных секторах экономики не очень высока, но все прогнозы предсказывают экспоненциальный рост в ближайшие несколько лет. В современной научной литературе экспериментально апробированы прототипы большинства бытовых устройств с использованием графена или его производных. Широкий спектр возможных применений обусловлен возможностью контроля свойств графенового слоя управлением параметрами при росте и путем обработки графеновых материалов после синтеза. К наиболее актуальным задачам синтеза графенового слоя относятся вопросы контроля размера кристалла, количества дефектов, скорости роста и взаимодействия графенового слоя с каталитической подложкой.

В настоящем докладе представлен узкий класс теплообменных устройств на основе графен-полимерных композитов. Сформулированы требования к параметрам графенового покрытия и обсуждены способы их достижения в современной технологии химического осаждения. Описаны способы контроля скорости формирования зародышей кристаллической фазы, скорости роста 2D графенового кристалла, контроля количества графеновых слоев и их взаимодействия с каталитической подложкой, на базе экспериментальных результатов полученных в Институте теплофизики СО РАН. В заключении представлена дорожная карта развития графеновой индустрии в мире и России.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-19-00213).